

7. Любченко А.В., Олих Я.М. // ФТТ. — 1985. — 27, вып.8. — С.2505 — 2507.

8. Алфеев В.Н., Горбик П.П., Горшков А.В. и др. // УФЖ. — 1991. — 36, № 1. — С.100 — 103.

Институт химии поверхности АН Украины
(252650 Киев 28, просп. Науки, 31)Получено 06.02.92,
в окончательном варианте — 25.03.92*П.П.Горбик, Б.М.Горслов, В.В.Дякин, Л.І.Миронцов,
В.С.Мельников, Д.В.Морозовська, В.М.Огенко, Г.М.Шалаяпіна***ПОВЕРХНЕВА ДИФУЗІЯ НІКЕЛЮ
В МЕТАЛОКСИДНИХ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНИХ НАДПРОВІДНИКАХ****Резюме**

Досліджено температурну залежність коефіцієнта дифузії Ni, вплив розмірів зерен, складу, внутрішнього непорядку і змінних деформацій на дифузію в високотемпературних надпровідниках $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ і $(\text{Bi}_{0,8}\text{Pb}_{0,2})_2\text{Ca}_2\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$. В обох системах дифузія характеризується швидкою і повільною компонентами з близькими значеннями енергії активації Δ в температурному інтервалі 200 — 500 °С. В системі 123 спостерігається перехід від дво- до однокомпонентної дифузії із стрибком Δ при 400 °С. Температура стрибка і значення Δ високотемпературної дифузії залежать від розмірів зерен і дії змінних деформацій. Поведінка коефіцієнта дифузії пояснюється поверхневим механізмом міграції атомів Ni.

*P.P.Gorbik, B.M.Gorelov, V.V.Dyakin, L.I.Mirontsov,
V.S.Melnikov, D.V.Morozovskaya, V.M.Ogenko, G.M.Shalayapina***SURFACE DIFFUSION OF NICKEL
IN METALOXIDE HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS****Summary**

Temperature dependence of Ni diffusion coefficient and effect of grain size, composition, intrinsic disordering, variable deformations on diffusion were investigated in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ and $(\text{Bi}_{0,8}\text{Pb}_{0,2})_2\text{Ca}_2\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ high-temperature superconductors. In both systems diffusion is characterized by rapid and slow components with close values of activation energies Δ in the temperature range 200 to 500 °C. However in system 123 transition from two-component diffusion to one-component diffusion with Δ jump at 400 °C is observed. The jump temperature and Δ value of high-temperature diffusion depend on grain size and action of supersound deformations. The discovered behaviour of the diffusion coefficient is explained by surface mechanisms of migration of Ni atoms.

К ВОСЬМИДЕСЯТИЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ А.С.ДАВЫДОВА

УДК 539.12

© 1993 г.

*С.П.Кручинин, А.М.Яремко¹***МЕЖСЛОЕВЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СПЕКТРАХ ОТРАЖЕНИЯ
ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ВТСП-КРИСТАЛЛОВ**

Теоретически анализируются особенности оптических спектров отражения и поглощения ВТСП-кристаллов на основе Bi и Tl. В предложенном подходе учитываются сложный характер структуры кристаллов, возможность локализации возбуждений в изолированных слоях и последующего обмена возбуждениями вследствие взаимодействия между купратами CuO и квазивыврожденными с ними висмутowymi слоями.

Висмутсодержащие ВТСП-соединения, синтезированные и описанные недавно (см., например, [1 — 3]), в настоящее время интенсивно исследуются.

Цель настоящей работы — теоретическое исследование некоторых оптических особенностей, свойственных этим кристаллам, исходя из их структурного

устройств. Наиболее полные данные, на наш взгляд, об оптических свойствах этих веществ приводятся в работах [4, 5].

Вывод, который сделан в работе [4] на основании анализа литературных данных и своих результатов, заключается в следующем: из факта, что в спектрах кристаллов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ особенность при $E \approx 4$ эВ состоит из нескольких пиков и образует относительно интенсивную и более широкую полосу отражения, чем в спектрах $(\text{Ca, Sr})\text{CuO}_2$ (рис. 1), следует, что возбуждения в слое CuO_2 , как и в слоях $\text{Bi}_2\text{O}_2/\text{SrO}$, вероятно, дают суммарный вклад в этот широкий пик отражения. Вообще говоря, при этом слои $\text{Bi}_2\text{O}_2/\text{SrO}$ могут быть и изолирующими и не иметь прямого отношения к сверхпроводимости.

В соответствии с данными эксперимента будем полагать, что проводящие плоскости и непроводящие слои $\text{Bi}_2\text{O}_2/\text{SrO}$ обособлены и возбуждения, реализующиеся в них, в нулевом приближении достаточно хорошо сохраняются. Поэтому такой кристалл можно рассматривать как одномерный молекулярный кристалл, в котором в качестве молекул выступают вышеупомянутые плоскости, взаимодействующие между собой. Можно использовать здесь подход, хорошо известный в теории молекулярных кристаллов [6 — 8], отметив только одно важное обстоятельство: не все слои, входящие в элементарную ячейку, идентичны. Частоты переходов в них несколько различны, так что эта ситуация более близка к случаю комбинированного резонанса Ферми — Давыдова [8], где частоты в одной молекуле могут быть и различными.

В данной работе исследуем спектральные характеристики коэффициентов поглощения χ и преломления n . Затем полученную с их помощью частотную зависимость коэффициента от-

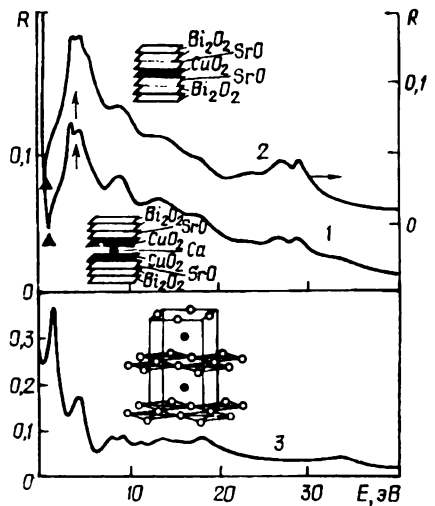


Рис. 1. Экспериментальные спектры отражения кристаллов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ (1), $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ (2) и $(\text{Ca, Sr})\text{CuO}_2$ (3) при $E \perp c$

ражения R сопоставим с экспериментом. Это дает возможность не только проверить разумность предложенной модели, но и определить ряд параметров кристалла, таких, как постоянные межслоевые взаимодействия, сила осциллятора перехода, невозмущенные энергии возбуждений и др.

1. Диэлектрическая функция кристалла

Для исследования спектрального распределения в области исследуемых переходов удобно перейти к представлению вторичного квантования. Согласно известной процедуре (см., например, [6, 7]) в приближении Гайтлера — Лондона оператор энергии возбуждения кристалла имеет вид

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{n\alpha} a_{n\alpha}^+ a_{n\alpha} (\Delta E_\alpha + D_\alpha) + \sum_{n\alpha \neq m\beta} a_{n\alpha}^+ a_{m\beta} M_{n\alpha, m\beta} = \\
 &= \sum_{k\alpha} a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha} (\Delta E_\alpha + D_\alpha) + \sum_{k, \alpha, \beta} a_{k\alpha}^+ a_{k\beta} M_{\alpha\beta}(k),
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

где величины $a_{k\alpha}^+$, $a_{k\alpha}$ следует рассматривать как бозе-операторы.

Диэлектрическая функция выражается через операторы $a_{k\alpha}^+$, $a_{k\alpha}$ [6, 8]:

$$\epsilon_{xx}(k, \omega) = \epsilon_{0xx} - \frac{4\pi}{v} \sum_{\alpha\beta} d_{\alpha x} d_{\beta x} \langle (a_{k\alpha} + a_{k\alpha}^+) (a_{-k\beta} + a_{-k\beta}^+) \rangle_{\omega}. \quad (2)$$

Здесь $v = ls$ — объем элементарной ячейки, l — размер вдоль оси, s — площадь слоя. В плоскости слоя (x, y) решетка кристалла квадратная, поэтому $\epsilon_{xx} \rightarrow \epsilon_0$.

Для нахождения зависимости $\epsilon_{xx}(k\omega)$ необходимо найти фурье-компоненты в соотношении (2).

2. Уравнения для функций Грина

Будем считать, что к оператору Гамильтона (1), определяющему свойства системы, прибавлен оператор $H_{\text{рел}}$, обуславливающий затухание возбуждений,

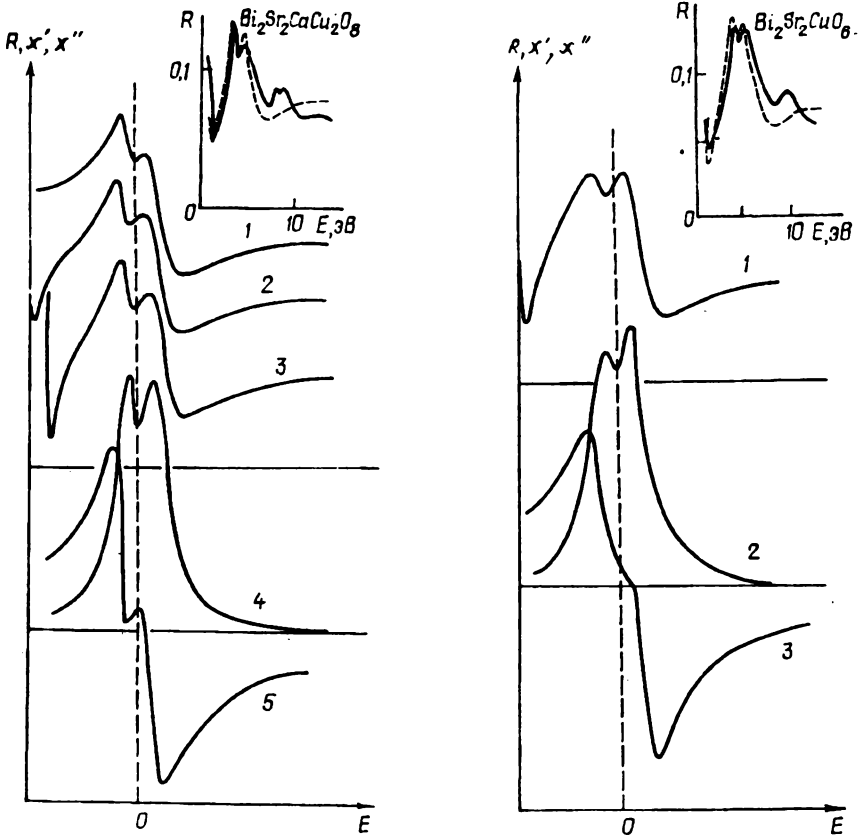


Рис.2. Спектральные зависимости R (1 — $\Delta = 0$, 2 — 0,05, 3 — 0,25), мнимой части восприимчивости χ'' в области резонансных переходов (4) и реальный χ' (5) (χ' и χ'' не зависят от Δ) для четырехслойного кристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$. На вставке — экспериментальная (сплошная кривая) и рассчитанная (штриховая) зависимости $R(E)$ при $a = a/E_0 = 0,05$, $b = d = 0$, $\sigma = 0,1$, $\beta = -0,4$, $2F = 0,035$, $E_0 = 4,5$ эВ, $\epsilon_0 = 3,5$, $\Delta = 0,25$

Рис.3. Спектральные зависимости R (1), χ' (2) и χ'' (3) для трехслойного кристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ при тех же параметрах, что и на вставке рис.2, но $\beta = 0,4$. На вставке — то же, что и на вставке рис.2

и учтем его влияние в конечных формулах, вводя константы затухания γ_i .

Из функций Грина, входящих в (2), представляют интерес только имеющие резонансы в области энергий $E \sim E_1, E_2$:

$$G_{\alpha\beta}(k\omega) = \langle (a_{k\alpha}(t); a_{k\beta}^+(0)) \rangle_{\omega}. \quad (3)$$

Уравнение для функций Грина ($\hbar = 1$) (3) с учетом фурье-преобразования сводится к такому:

$$\sum_{\gamma} \Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) G_{\gamma\beta}(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta}, \quad (4)$$

где

$$\Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}\omega) = (\omega - \tilde{\omega}_{\gamma})\delta_{\gamma\alpha} - M_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}), \quad \tilde{\omega}_{\alpha} = \Delta E_{\alpha} + D_{\alpha} - i\gamma_{\alpha}, \quad (5)$$

$\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера.

Используя правила алгебры, решение системы (4) запишем так:

$$G_{\gamma\beta}(\mathbf{k}\omega) = \frac{1}{\Delta(\mathbf{k}\omega)} \sum_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} A_{\alpha\gamma} = \frac{A_{\beta\gamma}(\mathbf{k}\omega)}{\Delta(\mathbf{k}\omega)}, \quad (6)$$

где

$$\Delta(\mathbf{k}\omega) = \det \|\Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}\omega)\|, \quad (7)$$

$A_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}\omega)$ — агебраическое дополнение к элементу $\Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}\omega)$ определителя $\Delta(\mathbf{k}\omega)$ системы. Таким образом, сумма $\sum_{\alpha\beta}$ в соотношении (2) преобразуется к достаточно простому выражению

$$\sum_{\alpha\beta} d_{\alpha x} d_{\beta x} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}\omega) = \sum_{\alpha\beta} d_{\alpha x} d_{\beta x} \frac{A_{\beta\alpha}(\mathbf{k}\omega)}{\Delta(\mathbf{k}\omega)}, \quad (8)$$

где $d_{\alpha x}$ — компоненты дипольных моментов различных слоев. В работе [9] проводится детальный расчет диэлектрической функции кристаллов по предложенной схеме. Приведем результаты расчетов для четырех- и трехслойного кристаллов.

3. Четырехслойный кристалл $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$

Диэлектрическая функция кристалла может быть записана в виде

$$\epsilon_{xx}(\omega) = \epsilon_{0xx} - \frac{4\pi d_{2x}^2 \{ \beta^2(\omega - \tilde{E}_2 - d) + 2\beta a + (\omega - \tilde{E}_1 - b) \}}{v(\omega - \tilde{E}_2 - d)(\omega - \tilde{E}_1 - b) - a^2}, \quad (9)$$

где $\beta = d_{1x}/d_{2x}$, отн. ед. — отношение компонентов дипольных моментов переходов (сил осцилляторов) в слоях $\text{Bi}_2\text{O}/\text{SrO}$ и CuO_2 соответственно (будем полагать, что $\mathbf{E} \parallel \mathbf{d}_1 \parallel \mathbf{d}_2$), при этом не обязательно $\mathbf{d}_1 \parallel \mathbf{d}_2$), $a = M_{12} = M_{34}$, $b = M_{14} = M_{41}$, $d = M_{23} = M_{32}$ — матричные элементы взаимодействия между слоями различной природы, между висмутовыми слоями и между купратными слоями соответственно.

Для исследования спектров отражения необходимо найти реальную и мнимую части диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega)$. Поскольку решетка кристаллов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ в плоскости слоя квадратная, можно опустить индексы xx при ϵ_{0xx} . Тогда выражение (9) удобно представить так:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 - \frac{4\pi}{v} \frac{2d_{2x}^2}{E_0} \frac{z_1 - iz_2}{c^2 + g^2}. \quad (10)$$

Если учесть явным образом затухание возбуждений $\tilde{E}_1 = E_1 - i\gamma_1$, $\tilde{E}_2 = E_2 - i\gamma_2$, то после несложных преобразований получаем

$$\chi' = \frac{2d_{2x}^2}{E_0 v} \frac{z_1}{c^2 + g^2}, \quad (11)$$

$$\chi'' = \frac{2d_{2x}^2}{E_0 v} \frac{z_2}{c^2 + g^2}. \quad (12)$$

Выражения для z_1, z_2, c и g приведены в работе [9].

4. Трехслойные кристаллы $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$

Диэлектрическая функция записывается следующим образом :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{4\pi d_{2x}^2}{v} \frac{2\beta^2(\omega - \tilde{E}_2) + 4a\beta + (\omega - E_1 - d)}{(\omega - \tilde{E}_2)(\omega - \tilde{E}_1 - d_1) - 2a^2}. \quad (13)$$

Выделим снова вещественную и мнимую части $\varepsilon(\omega)$. Запишем диэлектрическую проницаемость в стандартной форме :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 + 4\pi(\chi' + i\chi'') = \varepsilon_0 - \frac{4\pi d_{2x}^2}{vE_0} \frac{\Phi_1 - i\Phi_2}{c^2 + g^2}. \quad (14)$$

Выражения для Φ_1 и Φ_2 приведены в работе [9]. Тогда находим

$$\chi' = \frac{d_{2x}^2}{vE_0} \frac{\Phi_1}{c^2 + g^2}, \quad (15)$$

$$\chi'' = \frac{d_{2x}^2}{vE_0} \frac{\Phi_2}{c^2 + g^2}. \quad (16)$$

Величины, характеризующие потери (12), (16), положительны. Для обоих кристаллов появляется характерная величина $F = d_{2x}^2/vE_0$, которую назовем силой осциллятора перехода.

5. Коэффициент отражения, обсуждение результатов

Коэффициент отражения определяется выражением [10]

$$R(\omega) = \left| \frac{n(\omega) - 1}{n(\omega) + 1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2}, \quad (17)$$

в котором комплексный показатель преломления $n(\omega) = n + i\kappa$ связан с функцией диэлектрической проницаемости так:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon' + i\varepsilon'' = n^2(\omega) = (n + i\kappa)^2. \quad (18)$$

Из (17) и (18) тогда легко получаем

$$\varepsilon' = \varepsilon_0 + 4\pi\chi' = n^2 - \kappa^2, \quad (19)$$

$$\varepsilon'' = 4\pi\chi'' = 2n\kappa. \quad (20)$$

Как показывают данные расчетов, влияние параметра a (b, d можно принять равными нулю) на форму спектра отражения весьма значительное, однако низкочастотный край спектров обоих кристаллов невозможно сделать таким круто изменяющимся, как в эксперименте, при любых вариациях параметров. Причина состоит в том, что не учтено влияние плазменных возбуждений.

Такой учет нетрудно сделать, добавив к ϵ_0 слагаемое $-\omega_p^2/\omega^2$. Тогда получим

$$\epsilon_0 \rightarrow \tilde{\epsilon}_0 = \epsilon_0 - (\hbar\omega_p)^2/E_0^2(1+E)^2 = \epsilon_0 - \Delta/(1+E)^2.$$

Здесь $\Delta = (\hbar\omega_p)^2/E_0$, ω_p — плазменная частота, E_0 и E определяются в [9].

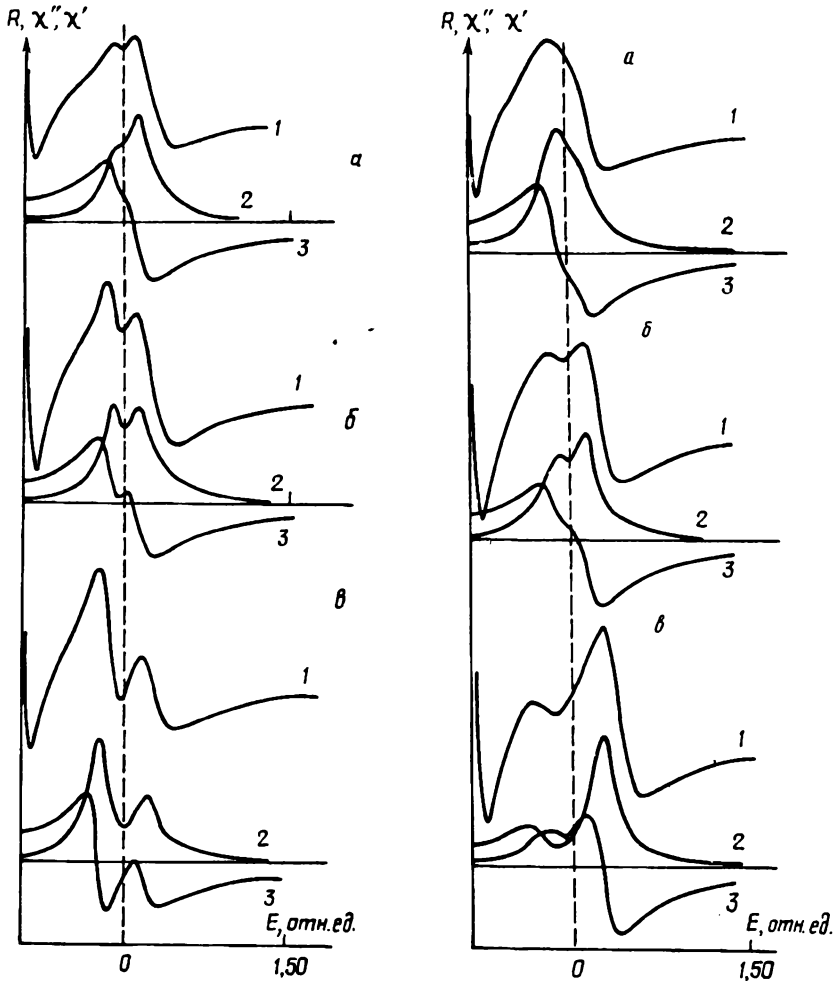


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, для четырехслойного кристалла при a , равных 0 (a), 0,05 (b) и 0,15 (b)
 Рис. 5. То же, что и на рис. 4, для трехслойного кристалла

Влияние параметра Δ , т.е. ω_p , на спектры отражения хорошо иллюстрируется рис. 2, где значения параметров a, b выбраны так, что достаточно хорошо описывается вершина наблюдаемого на эксперименте двугорбого максимума отражения кристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ (рис. 1, кривая 1). Главные детали участков отражения (см. вставки рис. 2, 3) описываются теоретическими зависимостями.

Влияние параметра межслоевого взаимодействия a (слоев $\text{Bi}_2\text{O}_2/\text{SrO}$ и CuO_2) на форму спектров иллюстрируется рис. 4, 5, где отчетливо видно его различие для кристаллов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$. В частности, если $a \rightarrow 0$, в спектре кристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ наблюдается только один максимум.

Приведенный анализ свидетельствует в пользу того, что слои в таких соединениях являются важными структурными единицами и оптические свойства кристалла в значительной мере определяются свойствами отдельных слоев.

Отметим, что приведенный в данной работе подход, использующий идеи молекулярных кристаллов, коррелирует с выводами работ [11,12] о возможно важной роли экситонов, возникающих в слоях, разделяющих слои CuO_2 для ВТСП-кристаллов.

1. *Mitdul C., Hervien M., Berel H.H. et al. // Z. Phys. — 1987. — 68. — S. 421 — 429.*
2. *Akimitsu J., Yamazaki A., Sawe H., Ruijuku H. // Jap. J. Appl. Phys. — 1987. — 226, N 1. — P. 2080 — 2082.*
3. *Maeda H., Tanaka J., Fukutomi H., Ageno T. // Ibid. — 1988. — 227, N 1. — P. 209 — 211.*
4. *Toreachi I., Tajima S., Eisahi H. et al. // Phys. Rev. B. — 1990. — 41, N 1. — P. 865 — 874.*
5. *Kelly M.K., Borloux R., Tarascou J.M., Aspnes D.E. // Ibid. — 1989. — 40, N 10. — P. 6797 — 6806.*
6. *Давыдов А.С. Теория молекулярных экситонов. — М.: Наука, 1968.*
7. *Агранович В.Н. Теория экситонов. — М.: Наука, 1968.*
8. *Яремко А.М., Лисица М.П. Ферми-резонанс. — Киев: Наук. думка, 1984.*
9. *Kruchinin S.P., Yaremko A.M. Interlayer Interaction in Absorption and Reflection Spectra of Bismuth HTSC Crystals. — Kiev, 1992. — (Prepr. / Acad. Sci. of Ukraine. ITP; ITP-92-17E).*
10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. — М.: ГИТТЛ, 1957.*
11. *Freeman A.J., Yu J. // Physica A. — 1987. — 150. — P. 50 — 57.*
12. *Weger M. // Ibid. B. — 1991. — 172 — P. 261 — 270.*

Институт теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова АН Украины
(252143 Киев 143, ул. Метрологическая, 146),

Получено 03.07.92

¹Институт полупроводников АН Украины
(252650 Киев 28, просп. Науки, 45)

С.П.Кручинин, О.М.Яремко

МІЖШАРОВІ ВЗАЄМОДІЇ В СПЕКТРАХ ВІДБІВАННЯ ВІСМУТВМІСНИХ ВТНП-КРИСТАЛІВ

Резюме

Теоретично аналізуються особливості оптичних спектрів відбивання і поглинання ВТНП-кристалів на основі Ві і Тl. У запропонованому підході враховуються складний характер структури кристалів, можливість локалізації збуджень в ізольованих шарах і наступного обміну збудженнями внаслідок взаємодії між купратами CuO і квазівиродженими з ними вісмутовими шарами.

S.P.Kruchinin, A.M.Yaremko

INTERLAYER INTERACTIONS IN REFLECTION SPECTRA OF BISMUTH-CONTAINING HTSC CRYSTALS

Summary

Peculiarities of the reflection and absorption optic spectra of HTSC-crystals based on bismuth and thallium are analysed in the paper. The approach suggested takes into account the complex character of crystals structure, possible localization of excitations in the isolated layers and further excitations exchange due to the interlayer interaction between cuprate CuO and quasi-degenerated bismuth layers.